

Общая физика

УДК 537.561:546

Аналитическое выражение для расчета ионизационных потенциалов элементов периодической системы

Л. А. Похмельных

Фирма "ЭЛАТ Со.", г. Мехико, Мексика

Комбинация квантовых, классических и дополнительных представлений позволяет прийти к аналитическому выражению для расчета ионизационных потенциалов элементов периодической системы с точностью не хуже 2 %. Главными допущениями, сделанными при построении модели взаимодействий, являются обратная зависимость расстояния электрон — ядро от номера элемента и протон-электронное зарядовое неравенство. Построения приводят к выводу о связи линии α_2 К-серии характеристического спектра с потенциалами ионизации второго электрона.

Одной из принципиально важных нерешенных проблем физики является взаимосвязь между непрерывностью макромиров и дискретностью микромиров. Эта взаимосвязь, вероятно, может быть установлена путем параллельного описания явлений с позиций дискретного (квантового) и непрерывного (классического) подходов в диапазоне масштабов, где непрерывное переходит в дискретное и наоборот, и где можно надеяться, что оба подхода работают. Таким диапазоном масштабов является атомный, ограниченный размерами 10^{-10} — 10^{-15} м. Исходя из этого, в данной работе была поставлена задача описать атомные взаимодействия с помощью классических или близких к ним представлений, основываясь на возможно более прямых экспериментальных данных. К таким данным относятся ионизационные потенциалы атомов, содержащие богатую количественную информацию о взаимодействии электронов атомной оболочки между собой и с атомным ядром. Естественно ожидать, что наиболее ясно интерпретируемую информацию содержат потенциалы отрыва наиболее близких к ядру электронов, так как на их взаимодействие с ядром в меньшей степени накладывается влияние других электронов, и вследствие этого аналитическая запись их взаимодействия со всеми составляющими атома может быть более простой. Ввиду этого представленные ниже построения начаты с них.

Аналитическая запись взаимодействий

В дальнейшем изложении n -й потенциал ионизации Z -го элемента будет обозначаться через U_{zn} , последний и предпоследний потенциалы Z -го элемента будут U_{zz} и $U_{z,z-1}$. Для удобства дальнейшего изложения электронам присвоены номера, которые отсчитываются от электрона, имеющего самый высокий потенциал ионизации атома. Так, в первых 11 элементах электрон с самым высоким потенциалом ионизации будет электроном 1, предпоследний потенциал будет относиться к электрону 2 и т. д. (В элементах дальнейших номеров потенциалы ионизации, относящиеся к первому электрону, до на-

стоящего времени не измерены.) При такой нумерации электрон определенного номера при изменении Z -го элемента как бы сохраняет свою индивидуальность и в любом элементе периодической таблицы может быть идентифицирован по номеру потенциала, отсчитываемого от самого большого. Таким образом, каждый электрон оболочки характеризуется набором потенциалов его отрыва, возрастающих с увеличением номера элемента. Так, потенциал ионизации в атоме с номером Z , относящийся к электрону номер N , будет иметь номер $n = N$, отсчитываемый от самого большого, или номер $n = Z - N + 1$, отсчитываемый от самого малого. В дальнейшем будет использована традиционная нумерация потенциалов от наименьшего, так как у большинства атомов периодической таблицы наибольшие ионизационные потенциалы остаются неизмеренными.

По причинам, которые станут ясными ниже, будем различать протон-протонные, протон-электронные и электрон-электронные электрические взаимодействия. С этой целью заряд протона будет обозначаться через e_p , а заряд электрона — через e_e .

Учитывая, что значения потенциалов ионизации получены исходя из равенства произведения величин зарядов протона и электрона квадрату элементарного

$$|e_e e_p| = e^2, \quad (1)$$

это условие будет учитываться и в дальнейшем. При сопоставлении расчетных значений потенциалов ионизации с фактическими в настоящей работе использованы экспериментальные данные из источника [1], приведенные со ссылками на работы [3, 4].

Известно, что в квантовой механике потенциалы отрыва последнего электрона U_{zz} атома с номером Z элементов описываются уравнением Бальмера—Ридберга, записанным для основного энергетического состояния водородоподобного атома:

$$U_{zz} = Z^2 e^{-1} R h, \quad (2)$$

где R и h — постоянные Ридберга и Планка;

e — элементарный заряд.

При классическом подходе и в предположении покоящегося электрона потенциал электростатического взаимодействия электрона 1 в атоме с зарядом ядра Z в отсутствии других электронов определяется зависимостью

$$U_{zz} = (4\pi\epsilon_0 r)^{-1} Z e_p, \quad (3)$$

где ϵ_0 — электрическая константа;

r — среднее расстояние между электроном и ядром.

Для согласования выражения (3) с реализующейся квадратичной зависимостью потенциала отрыва ближайшего к ядру электрона, т. е. электрона 1, от номера элемента (2) необходимо сделать первое допущение, без которого дальнейшее развитие данного подхода невозможно, а именно, что *среднее удаление электрона от ядра уменьшается обратно пропорционально номеру элемента*:

$$r = K_N Z^{-1} r_0, \quad (4)$$

где r_0 — некоторая константа расстояния; K_N — числовой коэффициент. Индекс при коэффициенте обозначает номер электрона, к которому относится значение. Для электрона 1 коэффициент $K_1 = 1$.

Возможная причина зависимости (4), а также другие допущения и следствия, возникающие в ходе построений, будут обсуждаться в последующих работах.

С учетом (1) и (4) зависимость (3) преобразуется в

$$U_{zz} = (4\pi\epsilon_0 K_1 r_0)^{-1} Z^2 e. \quad (5)$$

Для количественного согласования выражений (2) и (5) достаточно приравнять константу расстояния к комбинации известных констант

$$r_0 = e^2/4\pi\epsilon_0 K_1 R h. \quad (6)$$

Подстановка в (6) значений K_1 , R и h приводит к величине

$$r_0 = 1,0583 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (7)$$

Значение r_0 , близкое к (6), может быть получено из (3) и без привлечения квантовомеханических констант:

$$r_0 = e/4\pi\epsilon_0 U_1,$$

где U_1 — потенциал ионизации атома водорода. При $U_1 = 13,595 \text{ В}$ [1] это значение равно

$$r_0 = 1,0599 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (8)$$

Как видно, физический смысл константы r_0 — среднее расстояние между электроном и ядром в атоме водорода.

Различие величин в (7) и (8) характеризует точность дальнейших вычислений и сопоставлений расчетов с экспериментальными данными. Небольшие величины разностей потенциалов ионизации первого и второго электронов в атомах по сравнению с разностями потенциалов ионизации второго и третьего свидетельствуют о группировке электронов в электронные слои, причем наиболее близкий к ядру слой должен состоять из двух электронов, что соответствует устоявшимся представлениям.

В логике классического приближения у электронов 1 и 2, если их рассматривать как недеформируемые сферы, нет оснований различать энергетические состояния. Различие предпоследнего и последнего потенциалов ионизации в атоме может отражать лишь неравенство условий отрыва электронов: предпоследний электрон при удалении взаимодействует с ядром и с последним остающимся электроном, в то время как последний электрон — только с ядром. В случае неподвижных или синхронно вращающихся электронов минимум потенциальной энергии системы ядро—два электрона достигается при симметричном расположении электронов относительно ядра, при котором среднее расстояние между электронами равно удвоенному расстоянию каждого электрона до ядра. При несинхронном вращении электронов вокруг ядра наблюдателю, находящемуся на одном из электронов, второй будет представляться в виде сферического электронного облака с центром в ядре. Среднее расстояние между двумя электронами в этом случае равно расстоянию электрона до ядра. Для любого из этих вариантов потенциал отрыва электрона 2 в атоме элемента Z с учетом зависимости (4) может быть записан в виде

$$U_{z,z-1} = (4\pi\epsilon_0)^{-1} DK_1^{-1} Z \left(\frac{Ze_p}{r_0} - \frac{e_e}{mr_0} \right) = DK_1^{-1} Z U_1 (Z - Am^{-1}), \quad (9)$$

где $A = |e_e/e_p|$ — отношение абсолютных величин заряда электрона и протона; D — коэффициент, описывающий возможное нарушение зависимости (4) из-за увеличения расстояния между электронами вследствие их взаимного отталкивания ($0 \leq D \leq 1$);

m — коэффициент, отражающий расстояние между электронами, равное либо удвоенному расстоянию до ядра при покоящихся или синхронно вращающихся электронах ($m = 2$), либо одному расстоянию до ядра при независимо вращающихся электронах ($m = 1$).

Правый член в скобках описывает взаимодействие между электронами.

Ввиду принадлежности второго электрона к первому слою и полагаемого равенства состояний обеих частиц значение параметра K_2 должно быть принято равным K_1 . В этом случае разность последнего (5) и предпоследнего (9) ионизационных потенциалов элемента $Z \leq 11$ будет равна

$$\Delta U_1 = U_{z,z} - U_{z,z-1} = K_1^{-1} U_1 Z [Z(D-1) - Dm^{-1}A]. \quad (10)$$

В случае сохранения зависимости (4) коэффициент D в (10) равен единице, и выражение (10) преобразуется в

$$\Delta U_1 = U_{z,z} - U_{z,z-1} = K_1^{-1} U_1 Z A m^{-1}. \quad (11)$$

Отметим, что в случае $D \neq 1$ зависимость ΔU_1 (10) от номера элемента Z нелинейна.

Выражение (11), записанное для $Z-1$ -го элемента, будет иметь вид

$$\Delta U_2 = U_{z-1,z-1} - U_{z-1,z-2} = K_1^{-1} U_1 (Z-1) A m^{-1}, \quad (12)$$

поэтому разность (11) и (12)

$$\Delta_{1,2} = \Delta U_1 - \Delta U_2 = K_1^{-1} U_1 A m^{-1}. \quad (13)$$

Зависимость (13) позволяет рассчитать отношение величин зарядов электрона и протона по данным о последних двух потенциалах ионизации первых 11 элементов, у которых эти потенциалы измерены. В случае неподвижных или синхронизованных в движении электронов

$$A = 2K_1 U_1^{-1} \Delta_{1,2}, \quad (14)$$

а при независимом движении частиц

$$A = K_1 U_1^{-1} \Delta_{1,2}. \quad (15)$$

Обратимся к другой комбинации ионизационных потенциалов. Разность последних потенциалов Z -го и $Z-1$ -го элементов имеет вид:

$$\Delta U_3 = U_{z,z} - U_{z-1,z-1} = K_1^{-1} U_1 [Z^2 - (Z-1)^2]. \quad (16)$$

Аналогичная разность, записанная для $Z-1$ -го и $Z-2$ -го элементов, равна

$$\Delta U_4 = U_{z-1,z-1} - U_{z-2,z-2} = K_1^{-1} U_1 [(Z-1)^2 - (Z-2)^2]. \quad (17)$$

Разность выражений (16) и (17) приводит к зависимости

$$\Delta_{3,4} = \Delta U_3 - \Delta U_4 = 2K_1^{-1} U_1 = 2(4\pi\epsilon_0 r_0)^{-1} K_1^{-1} e_p, \quad (18)$$

откуда заряд протона

$$e_p = \frac{1}{2} K_1 (4\pi\epsilon_0 r_0) \Delta_{3,4}. \quad (19)$$

Можно убедиться, что соотношение (19) может быть получено также из разности предпоследних потенциалов ионизации смежных элементов, т. е. полагая

$$\Delta U_3 = U_{z,z-1} - U_{z-1,z-2},$$

$$\Delta U_4 = U_{z-1,z-2} - U_{z-2,z-3}.$$

Можно использовать и еще одну комбинация значений ионизационных потенциалов: разность предпоследнего потенциала Z -го и последнего $Z-1$ -го элементов равна:

$$\Delta U_5 = U_{z,z-1} - U_{z-1,z-1} = K_1^{-1} U_1 [Z^2 - (Z-1)], \quad (20)$$

а разность предпоследнего потенциала $Z-1$ -го и последнего $Z-2$ -го элементов для случая неподвижных и синхронизованных в движении электронов

$$\Delta U_6 = U_{z-1,z-2} - U_{z-2,z-2} = K_1^{-1} U_1 [(Z-1)^2 - (Z-1)Am^{-1} - (Z-2)^2 A]. \quad (21)$$

Разность выражений (20) и (21) равна:

при неподвижных или синхронно вращающихся электронах

$$\Delta_{5,6} = \Delta_5 - \Delta_6 = K_1^{-1} U_1 \left(2 - \frac{1}{2} A \right), \quad (22)$$

при их несинхронизованном движении

$$\Delta_{5,6} = \Delta_5 - \Delta_6 = K_1^{-1} U_1 (2 - A). \quad (23)$$

Соотношения (22) и (23) позволяют дополнительно проверить результаты, полученные с помощью (14), (15) и (19).

Вычисления и результаты

Измеренные потенциалы ионизации элементов из [1] см. ниже в табл. 6 (верхние числа).

Разности последнего и предпоследнего потенциалов для элементов 2—11 имеют значения: 29,82; 46,80; 63,81; 80,83; 97,85; 114,9; 132,0; 148,0; 164,8; 181,7 В. С точностью не хуже 2 % этот ряд представляет собой линейную зависимость от Z . В пределах этой точности коэффициент D в (10) равен единице. Отметим, что энергия взаимодействия ближайших к ядру электронов между собой в атомах первых десяти элементов в случае их симметричного расположения относительно ядра должна находиться в пределах 5—25 %. Вычисленные на основе данных о потенциалах ионизации (см. табл. 6) значения параметров $\Delta_{1,2}$, $\Delta_{3,4}$ и $\Delta_{5,6}$ приведены в табл. 1.

При расчетах параметра $\Delta_{3,4}$ использованы последние и предпоследние потенциалы ионизации, т. е. относящиеся к первому и второму электронам (первая и вторая строка, соответственно).

Т а б л и ц а 1

	Номер элемента Z									Среднее значение
	1,2,3	2,3,4	3,4,5	4,5,6	5,6,7	6,7,8	7,8,9	8,9,10	9,10,11	
$\Delta_{1,2}$	16,90	17,01	17,02	17,02	17,05	17,09	16,00	16,80	16,90	16,86 ± 0,21
$\Delta_{3,4}$	27,20	27,23	27,23	27,24	27,26	27,32	26,39	27,72	27,80	27,65 ± 0,52
	27,19	27,21	27,24	27,25	27,25	27,49	26,91	27,70	27,23	
$\Delta_{5,6}$	10,23	10,21	10,21	10,22	10,23	10,20	10,40	10,90	10,33	10,32 ± 0,14

Полученные значения параметров Δ соответствуют следующим величинам отношения зарядов электрона (14), (15) и протона (19) к элементарному:

заряд протона

$$e_p = (1,60 \pm 0,03) \cdot 10^{-19} \text{ Кл} = (1,00 \pm 0,03) e ,$$

заряд электрона в предположении неподвижности или синхронного движения двух ближних к ядру электронов (14)

$$e_e = - A e_p = - A e = - (2,48 \pm 0,05) e ,$$

а в предположении независимого движения электронов (15)

$$e_e = - A e = - (1,24 \pm 0,025) e . \quad (24)$$

Проверка полученных величин с помощью (22) и (23) в обоих случаях дает величину $\Delta_{5,6} = 10,33 \text{ В}$, в пределах точности измерений потенциалов совпадающую с рассчитанным в табл. 1.

Рассмотрение электронов 1 и 2 не позволяет отдать предпочтение одному из двух полученных значений зарядов электрона и, соответственно, тому или другому расположению и состоянию электронов в слое. Для получения заключения о реализующейся эффективной величине заряда электрона могут быть использованы данные об ионизационных потенциалах элементов дальнейших номеров.

Рассмотрим электрон 3. В элементе $Z = 3$ электрон 3 во втором слое является единственным. Если предположить, что второй слой образуется на удалении не менее чем r_0 от ядра, о чем свидетельствует низкое значение первого потенциала ионизации в атоме лития, то ввиду зависимости (4) в этом элементе электроны 1 и 2 находятся на расстоянии от ядра примерно в 3 раза меньшем, чем электрон 3. Ввиду этого, при покоящихся или вращающихся вокруг ядра электронах, расстояние между третьим и первыми двумя в среднем близко к расстоянию электрона 3 до ядра. Согласно (4) расстояние между электроном 3 и ядром

$$r_{e3} = K_3 Z^{-1} r_0 , \quad (25)$$

где K_3 в отличие от K_1 может быть не равным 1. С учетом (25) выражение для потенциала отрыва электрона 3 в атоме элемента $Z \geq 3$ имеет вид

$$U_{z,z-2} = K_3^{-1} U_1 Z (Z - 2A) . \quad (26)$$

Из выражения (26) видно, что расчетные потенциалы ионизации электрона 3 все положительны только при $2A < 3$, что может удовлетворить только условие (24). Таким образом, *правомерно представление о несинхронно движущихся электронах, которые формируют заряженные сферические слои вокруг ядра*. Это представление в целом не противоречит квантово-механическим представлениям. Вариант (24) соответствует в (9) значению $m = 1$.

Для определения значения коэффициента K_3 достаточно составить комбинацию потенциалов электрона, аналогичную построенной для получения параметра $\Delta_{3,4}$ (18). Согласно (26), потенциал отрыва электрона 3 в $Z + 1$ -м элементе

$$U_{z+1,z-1} = U_1 K_3^{-1} \left[(Z+1)^2 - 2(Z+1)A \right] . \quad (27)$$

Разность выражений (27) и (26) равна:

$$\Delta U = U_{z+1,z-1} - U_{z,z-2} = 2U_1 K_3^{-1} \left[Z - A + \frac{1}{2} \right] , \quad (28)$$

а аналогичная разность для элементов Z и $Z-1$:

$$\Delta U_8 = U_{z,z-2} - U_{z-1,z-3} = 2U_1 K_3^{-1} \left[Z - A - \frac{1}{2} \right]. \quad (29)$$

Разность выражений (28) и (29) дает

$$\Delta_{7,8} = \Delta U_7 - \Delta U_8 = 2U_1 K_3^{-1}. \quad (30)$$

Значения $\Delta_{7,8}$, рассчитанные на основе величин ионизационных потенциалов электрона 3, приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2

	Номер элемента Z										
	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$U_{z,z-2}$	5,390	18,206	37,92	64,47	97,863	138,08	185,139	239,1	299,7	367,2	441,9
$U_{z+1,z-1} - U_{z,z-2}$	12,81	19,71	26,556	33,378	40,217	47,06	53,96	60,60	67,50	74,70	
$\Delta_{7,8}$	6,90	6,84	6,83	6,83	6,84	6,90	6,63	6,90	7,20		

Среднее значение $\Delta_{7,8} = 6,874 \pm 0,009$ В. Этот результат соответствует в (30) значению

$$K_3 = 3,957 \pm 0,005.$$

Найденное значение K_3 позволяет с помощью зависимости (26) вычислить потенциалы ионизации третьего электрона с учетом суммы значений A первых двух электронов и сравнить их с фактическими (табл. 3).

Т а б л и ц а 3

	Номер элемента Z										
	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$U_{изм}$	5,390	18,206	37,90	64,476	97,863	138,08	185,14	239,1	299,7	367,2	441,9
$U_{расч}$	5,362	20,899	43,31	72,598	108,76	151,79	201,70	258,49	322,15	392,69	470,10
$\Delta_z = U_{расч} - U_{изм}$	-0,028	2,69	5,41	8,12	10,89	13,71	16,56	19,39	22,45	25,49	28,20
$\Delta_{z+1} - \Delta_z$		2,72	2,72	2,71	2,77	2,82	2,85	2,83	3,06	3,04	2,71

Из табл. 3 следует, что между расчетными и измеренными значениями имеется расхождение, увеличивающееся пропорционально $Z-3$. Это расхождение соответствует дополнительной отталкивающей силе, действующей на электрон 3. Введение в (26) дополнительного члена, описывающего это воздействие, приводит к зависимости потенциалов отрыва третьего электрона от номера элемента в виде

$$U_z = U_1 K_2^{-1} Z(Z - 2A) - C_3(Z - 3), \quad (31)$$

где C_3 — некоторая постоянная величина, действительная для электрона 3.

Использование зависимости (31) позволяет при уточненных значениях параметров $K_3 = 3,969$; $2A = 2,4756$; $C_3 = 2,6852$ В; $U_1 = 13,600$ В снизить расхождение между расчетными величинами и измеренными до долей процента (табл. 4).

Т а б л и ц а 4

	Номер элемента Z										
	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$U_{изм}$	5,390	18,206	37,90	64,476	97,863	138,08	185,14	239,1	299,7	367,2	441,9
$U_{расч}$	5,390	18,208	37,87	64,404	97,780	138,01	185,09	239,03	299,82	367,46	441,96

Использование (31) для расчета потенциалов отрыва электрона 2 с константами $U_1 = 13,600$ В, $K_2 = 0,997$, $C_2 = 2,316$ В и при $A_1 = 1,099$ также приводит к хорошему соответствию с фактическими значениями (табл. 5).

Таблица 5

	Номер элемента Z										
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$U_{изм}$	24,580	75,619	153,85	259,298	391,986	551,925	739,114	953,8	1196,4	1464,7	1761,23
$U_{расч}$	24,580	75,478	153,66	259,118	391,860	551,885	739,192	953,78	1195,6	1464,8	1761,23

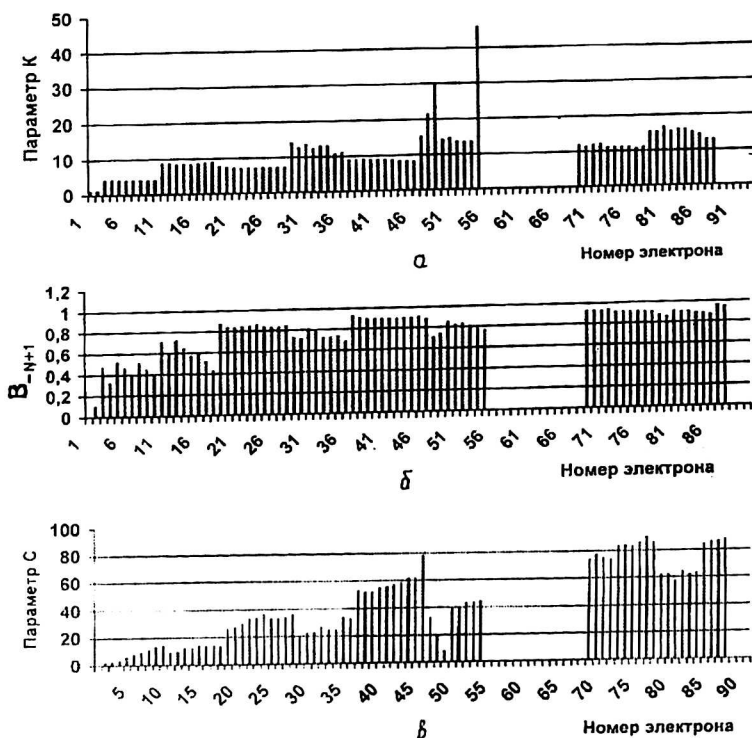
С учетом компоненты отталкивания выражение для определения ионизационного потенциала электрона произвольного номера N в элементе Z приобретает вид

$$U_{Z,N} = U_1 K_N^{-1} Z[Z - B_N] - C_N(Z - N), \quad (32)$$

где $B_N = \left(\sum_1^{N-1} A_i \right)$ — сумма значений A электронов номеров меньше N ;

K_N , B_N и C_N — константы электрона номер N .

Подбор констант для каждого электрона позволяет с помощью зависимости (32) привести расчетные потенциалы ионизации всех элементов периодической таблицы в соответствие с измеренными с отклонениями не более 2 % (табл. 6). В ячейках таблицы верхние значения потенциалов являются измеренными, взятыми из работы [1], а нижние — рассчитанными. В столбцах, обозначенных через $U_1 - U_{11}$, приведены потенциалы ионизации в вольтах с нумерацией от малого. Потенциалы, относящиеся к электрону N , расположены по диагонали вниз начиная с первого потенциала ионизации элемента $Z = N$. На рисунке значения параметров K_N , B_N , C_N представлены графически в функции номера электрона.



Значения параметров констант электрона:
а — K_N ; б — B_N ; в — C_N

Таблица 6

Номер элемента Z	Элемент	U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6	U_7	U_8	U_9	U_{10}	U_{11}
1	H	13,595 13,600										
2	He	24,580 24,580	54,403 54,400									
3	Li	5,390 5,390	75,619 75,478	122,42 122,40								
4	Be	9,320 9,320	18,206 18,208	153,85 153,66	217,66 217,60							
5	B	8,296 8,296	25,149 25,184	37,92 37,87	259,298 259,118	340,13 340,00						
6	C	11,264 11,264	24,376 24,458	47,864 47,904	64,476 64,404	391,986 391,860	489,84 489,60					
7	N	14,54 14,54	29,605 29,645	47,426 47,484	77,45 77,46	97,863 97,780	551,925 551,885	666,83 666,40				
8	O	13,614 13,614	35,146 35,208	54,934 54,937	77,394 77,392	113,873 113,864	138,08 138,01	739,114 739,192	871,12 870,40			
9	F	17,418 17,418	34,98 35,16	62,646 62,708	87,23 87,13	114,214 114,180	157,117 157,111	185,139 185,09	1101,8 1101,6			
10	Ne	21,559 21,559	41,07 41,08	63,5 63,64	97,16 97,23	126,4 126,8	157,91 157,85	207,2 207,20	239,1 239,03	1195,4 1159,6	1360,2 1360,0	
11	Na	5,138 5,138	47,29 47,46	71,8 71,7	98,88 99,01	138,6 138,56	172,36 172,34	208,444 208,398	264,2 264,14	299,7 299,82	1464,7 1464,8	1646,4 1645,6
12	Mg	7,644 7,644	15,03 15,40	78,2 80,30	109,29 109,23	141,23 141,27	186,8 186,8	225,31 225,32	265,957 265,83	328,0 327,92	367,2 367,46	1761,23 1761,23
13	Al	5,984 5,980	18,823 19,135	28,44 28,82	119,96 120,07	153,77 153,70	190,42 190,41	241,8 241,94	285,13 285,31	330,1 330,14	398,6 398,54	441,9 441,96
14	Si	8,149 8,149	16,34 16,49	33,46 33,77	45,13 45,39	166,73 166,77	205,11 205,12	246,41 246,43	304,0 303,97	351,83 352,00	401,3 401,33	476,0 476,0
15	P	10,55 10,55	19,65 19,96	30,156 30,28	51,354 51,576	65,007 65,12	220,414 220,400	263,31 263,46	309,3 309,34	372,8 372,88	425,46 425,77	479,4 479,4
16	S	10,357 10,357	23,4 23,62	34,8 34,98	47,29 47,10	72,5 72,52	88,0 88,00	280,99 280,96	328,4 328,74	378,95 379,14	448,5 448,70	506,4 506,4
17	Cl	13,01 13,01	23,80 24,08	39,9 39,95	53,3 53,23	67,8 67,68	96,6 96,63	114,2 114,04	348,5 348,45	400,3 400,96	455,3 455,82	531,4 531,4

Продолжение табл. 6

Номер элемента Z	Элемент	U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6	U_7	U_8	U_9	U_{10}	U_{11}
18	Ar	15,755	27,62	40,90	59,79	75,0	91,3	123,9	143,4	422,6	479,0	539,5
		15,755	28,07	40,98	59,56	74,69	91,30	123,9	143,24	422,9	480,11	539,5
19	K	4,339	31,81	45,90	61,1	82,6	99,4	117,9	154,3	176,0	503,8	566,2
		4,339	32,30	46,26	61,10	82,44	99,36	118,4	154,3	175,6	504,2	566,2
20	Ca	6,111	11,87	51,21	67,3	84,39	108,6	127,9	143,3	187,9	211,3	592,5
		6,111	14,44	51,82	67,6	84,41	108,6	127,25	148,4	187,9	211,10	592,6
21	Sc	6,56	12,89	24,75	73,9	91,8	111,1	139	159,2	180,2	224,9	249,76
		6,56	17,60	28,11	74,51	92,08	110,92	138,0	158,35	181,8	226,63	249,76
22	Ti	6,83	13,57	28,14	43,24	99,8	119	141	172	193,1	216,9	264,5
		6,83	18,43	32,71	45,357	100,18	119,7	140,38	170,76	192,67	218,5	264,5
23	V	6,74	14,65	29,31	48	65,2	128,9	151	173,7	206	230,2	256,3
		6,74	18,87	33,93	51,48	66,18	128,9	150,47	173,57	206,76	230,2	256,0
24	Cr	6,764	16,49	30,95	49,6	73,2	90,6	161,1	185	209	246	—
		6,764	19,67	34,78	53,20	73,93	90,59	160,63	184,39	209,7	246	—
25	Mn	7,432	15,64	33,69	52	76,1	100	119,24	196,4	221	249	—
		7,432	18,89	36,46	54,59	76,2	100,00	118,57	195,42	221,45	249	—
26	Fe	7,896	16,18	30,64	57,1	78	102,92	130	151,1	234,4	262	290,3
		7,896	21,17	34,87	57,11	78,28	102,93	129,75	150,31	233,24	261,66	291,15
27	Co	7,86	17,05	33,49	53	83,5	106	133	163	185,9	276,9	305
		7,86	22,45	38,50	54,73	81,61	105,85	133,38	163,17	185,28	274,1	305
28	Ni	7,633	18,15	36,16	56	78	110	136	168	200	224	318
		7,633	23,04	40,52	59,40	78,45	109,97	137,32	167,6	200,24	224	318
29	Cu	7,724	20,29	36,83	58,9	82	106	140	169	206	241	—
		7,724	23,37	41,70	62,14	83,88	106,04	142,19	172,66	205,45	241	—
30	Zn	9,391	17,96	39,70	62	86	112	142	177	212	247	—
		9,391	18,67	42,65	63,86	87,2	111,95	137,5	178,2	211,9	247	—
31	Ga	6,00	20,51	30,7	64,2	90	118	144	174	218	255	—
		6,00	20,87	31,58	65,45	89,50	116,0	143,59	172,82	218,21	255	—
32	Ge	7,88	15,93	34,21	45,7	93,4	113	148	177	212	262	—
		7,88	16,44	34,54	46,47	91,80	118,62	148,2	178,81	212,0	262	—
33	As	9,81	18,7	28,3	50,1	62,9	127,5	150	182	218	274	—
		9,81	18,67	28,91	50,38	63,31	121,6	151,62	183,9	217,61	255	—
34	Se	9,75	21,5	32,0	42,9	68,3	82,1	155	187	223	260	—
		9,75	21,79	31,72	43,40	68,39	82,12	155,1	187,34	223,2	260	—

Продолжение табл. 6

Номер элемента Z	Элемент	U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6	U_7	U_8	U_9	U_{10}	U_{11}
35	Br	11,84	21,6	35,9	47,3	59,7	88,6	103,0	193	228	266	—
		11,84	21,99	35,90	47,02	59,23	88,56	102,9	192,0	226,93	266	—
36	Kr	13,966	24,56	36,9	52,5	64,7	78,5	111,0	126	234	270	—
		13,966	24,31	36,30	52,14	64,56	78,49	110,91	125,6	232,5	270	—
37	Rb	4,176	27,56	39,3	52,6	71	84,4	99,2	136	150	277	—
		4,176	27,60	39,32	52,70	70,47	84,35	99,08	135,43	151,4	276	—
38	Sr	5,692	11,026	43,6	57,1	71,6	90,8	106	122,3	162	177	324
		5,692	10,98	43,66	56,88	71,19	90,94	106,39	121,69	162,13	177	324
39	Y	6,38	12,23	20,5	61,8	77	93	116	129	146,2	191	—
		6,38	13,40	20,92	62,18	77,0	91,78	113,50	130,67	146,34	191	—
40	Zn	6,835	12,92	24,11	33,97	82,3	99,4	116	139	154	173	—
		6,835	15,29	24,71	33,98	83,16	99,69	114,45	138,2	157,21	173	—
41	Nb	6,88	13,9	28,1	38,3	49,5	110,4	124	141	165	186	—
		6,88	16,28	27,19	38,78	50,18	106,61	124,93	139,2	165,08	186	—
42	Mo	7,131	15,72	29,6	46,4	61,2	67	131	153	167	194	—
		7,131	17,32	28,81	42,10	55,88	69,50	132,5	152,73	166,56	194	—
43	Te	7,23	14,87	31,9	43	59	76	94	161	183	195	—
		7,23	17,30	30,84	44,46	60,03	76,03	91,95	160,88	183,09	195	—
44	Ru	7,36	16,6	30,3	46,5	63	81	100	119	192	216	—
		7,36	18,28	26,67	47,49	63,24	81,00	99,21	117,52	191,71	216	—
45	Rh	7,46	15,92	32,8	45,6	67	85	105	126	147	225	—
		7,46	18,98	32,46	46,97	67,27	85,15	104,98	125,45	146,2	225	—
46	Pd	8,33	19,42	33,4	48,8	66	90	110	132	155	178	—
		8,33	20,07	33,84	49,80	66,50	90,18	110,19	131,98	154,72	178	—
47	Ag	7,574	21,48	36,10	52	70	89	116	139	162	187	—
		7,574	20,57	35,92	51,97	70,29	89,15	116,21	138,35	162,00	187	—
48	Cd	8,991	16,904	44,5	55	73	94	115	146	170	195	—
		8,991	19,04	36,59	55,03	73,33	93,93	114,93	145,36	169,64	195	—
49	In	5,785	18,86	28	58	77	98	120	144	178	204	—
		5,785	21,40	32,31	56,45	77,39	97,96	120,72	143,83	177,64	204	—
50	Sn	7,332	14,63	30,7	46,4	81,1	103	126	150	176	213	—
		7,332	20,73	34,93	47,39	80,14	103,02	125,84	150,66	175,87	213	—
51	Sb	8,54	16,7	24,8	44,1	63,8	107,6	132	157	184	211	—
		8,54	16,85	36,48	49,56	64,30	107,66	131,90	156,98	183,76	211	—

Продолжение табл. 6

Номер элемента Z	Элемент	U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6	U_7	U_8	U_9	U_{10}	U_{11}
69	Tm	6,14 6,14	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
70	Yb	6,26 6,26	12,10 12,59	—	—	—	—	—	—	—	—	—
71	Lu	6,15 6,15	14,7 13,03	19 21,17	—	—	—	—	—	—	—	—
72	Hf	5,5 5,5	14,9 13,98	21 22,20	31 32,11	—	—	—	—	—	—	—
73	Ta	7,88 7,88	16,2 14,27	22,3 24,05	33,1 33,75	45 45,35	—	—	—	—	—	—
74	W	7,98 7,98	17,7 16,40	24,1 25,29	35,4 36,42	48 47,68	61 60,90	—	—	—	—	—
75	Re	7,87 7,87	16,6 14,73	26 27,32	37,7 38,60	51 51,10	64 64,80	79 78,74	—	—	—	—
76	Os	8,7 8,7	17 16,89	25 26,60	40 40,72	54 54,16	68 68,00	83 82,67	99 98,88	—	—	—
77	Ir	9,2 9,2	17,0 18,21	27 28,29	39 39,6	57 56,60	72 72,00	88 87,38	104 103,74	121 121,31	—	—
78	Pt	8,96 8,96	18,54 19,12	28,5 30,16	41,1 42,12	55 55,04	75 74,95	92 92,1	109 108,98	127 127,19	146 146	—
79	Au	9,223 9,223	20,5 20,07	30,5 31,40	43,5 44,58	58 58,38	73 72,93	96 95,76	114 114,46	133 132,88	153 153	—
80	Hg	10,434 10,434	18,761 18,40	34,21 33,58	46 46,36	61 61,48	77 77,06	94 93,27	120 119,05	139 139,1	159 159	—
81	Tl	6,106 6,106	20,42 20,40	29,8 29,37	50,7 49,55	64 63,88	81 80,85	98 98,18	116 116,06	145 144,82	166 166	—
82	Pb	7,415 7,415	15,03 15,05	31,93 32,13	42,3 42,12	68,00 68,00	84 83,97	103 102,69	122 121,70	142 141,30	173 173	—
83	Bi	7,287 7,287	19,3 16,53	25,6 25,60	45,3 45,64	56 55,29	94,42 88,88	107 106,62	127 127,00	148 147,69	169 169	—
84	Po	8,2 8,2	19,4 17,59	27,3 27,56	38 37,75	61 60,92	73 72,98	112 112,24	132 121,84	154 153,79	176 176	—
85	At	9,2 9,2	20,1 18,32	29,3 29,61	41 40,30	51 51,58	78 77,98	91 91,05	138 138,05	160 159,63	183 183	—

Окончание табл. 6

Номер элемента Z	Элемент	U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6	U_7	U_8	U_9	U_{10}	U_{11}
86	Rn	10,745 10,745	20,4 19,78	29,4 30,11	43,8 43,36	55 54,80	67 67,01	97 96,83	111 110,91	166 166,33	190 190	—
87	Fr	3,98 3,98	22,5 21,54	33,5 32,12	43 43,63	59 58,83	71 71,09	84 84,07	117 117,45	133 132,56	197 197	—
88	Ra	5,277 5,277	10,144 10,45	34,3 34,25	46,4 46,28	58,5 58,87	76 76,02	89 89,16	103 102,76	140 139,84	156 156	—
89	Ac	6,89 —	11,5 11,5	—	49 48,85	62 62,25	76 75,836	95 94,94	109 109,00	123 123,08	164 164	—
90	Th	6,95 —	11,5 —	20,0 20,0	28,7 28,7	65 65,33	80 80,04	94 94,52	115 115,57	130 130,62	145 145	—
91	Pa	— —	— —	—	—	—	84 83,71	100 99,63	115 114,69	138 137,93	154 154	—
92	U	6,2 —	— —	—	—	—	—	104 104	121 121	137 137	— 162	—

В табл. 7 даны значения параметров электронов K_N, B_N, C_N , с помощью которых выполнены вычисления.

Таблица 7

№ п/п	K_N	C_N	B_N	№ п/п	K_N	C_N	B_N	№ п/п	K_N	C_N	B_N
1	1	0	0	26	7,7	33,443	25,828	51	14,4	38,79	50,820
2	0,997	2,316	1,099	27	7,8	33,933	26,833	52	13,5	43,369	51,828
3	3,969	2,685	2,476	28	7,7	35,750	27,846	53	13,5	43,705	52,804
4	3,974	3,573	3,319	29	13,85	18,772	28,729	54	13,5	44,261	53,777
5	3,953	6,160	4,517	30	12,53	22,464	29,712	55	46,0	—	54,760
6	3,930	7,732	5,457	31	13,4	22,235	30,809	69	11,83	74,219	68,922
7	3,946	8,982	6,397	32	12,1	26,538	31,781	70	11,43	77,781	69,925
8	3,950	11,088	7,507	33	12,83	24,35	32,719	71	11,8	75,306	70,924
9	3,922	12,941	8,442	34	13,00	24,69	33,725	72	12,0	74,043	71,933
10	3,925	14,360	9,378	35	10,63	33,95	34,735	73	11,0	83,144	72,912
11	8,62	9,137	10,704	36	11,05	32,33	35,684	74	11,1	83,910	73,912
12	8,62	9,661	11,596	37	8,70	52,70	36,928	75	11,20	83,42	74,913
13	8,30	12,891	12,719	38	8,94	51,50	37,906	76	11,0	85,838	75,907
14	8,46	12,883	13,638	39	9,00	51,74	38,891	77	10,6	90,370	76,907
15	8,30	13,867	14,570	40	8,70	54,86	39,890	78	11,05	86,298	77,906
16	8,49	14,178	15,595	41	8,7	55,426	40,892	79	15,3	62,030	78,869
17	8,65	14,017	16,513	42	8,7	57,242	41,891	80	15,3	62,179	79,853
18	8,95	13,198	17,424	43	8,63	58,476	42,893	81	16,7	57,936	80,907
19	7,6	25,93	18,872	44	8,36	61,762	43,897	82	15,3	64,692	81,898
20	7,43	27,297	19,832	45	8,36	62,397	44,898	83	15,8	62,087	82,898
21	7,30	29,48	20,832	46	7,10	78,014	45,905	84	15,8	63,187	83,886
22	7,00	32,964	21,840	47	15,0	32,224	46,882	85	15,0	67,551	84,880
23	7,05	33,661	22,848	48	21,40	19,07	47,705	86	14,4	71,471	85,868
24	7,03	36,533	23,854	49	30	7,943	48,735	87	13	85,959	86,956
25	7,6	33,076	24,834	50	14,1	39,869	49,847	88	13	86,852	87,942

Из табл. 7 следует, что значения параметра A , получаемые на основе потенциалов ионизации электронов различных номеров, не совпадают между собой. В связи с этим в дальнейшем изложении ему будут присваиваться нижние индексы, обозначающие номер электрона, к которому относится значение. Из табл. 7 следует также, что расчетное значение A_1 отличается от полученного ранее (24). Это закономерно в связи с различием зависимостей (9) и (32), использованных для расчета.

Покажем, что использование зависимости (32) приводит к соотношению для вычисления A , отличающемуся от (15).

Вычисление $\Delta U_1, \Delta U_2$ и $\Delta_{1,2}$ (11)–(13) с использованием выражения (32) при $Z = 2$ и $m = 1$ дает

$$\Delta U_1 = U_{z,1} - U_{z,2} = K_1^{-1} U_1 Z B_2 + C_2 Z - 2C_2,$$

$$\Delta U_2 = U_{z-1,1} - U_{z-1,2} = K_1^{-1} U_1 (Z - 1) B_2 + C_2 (Z - 1) - 2C_2,$$

$$\Delta_{1,2} = \Delta U_1 - \Delta U_2 = K_1^{-1} U_1 B_2 + C_2. \tag{34}$$

Из (34) следует $B_2 \equiv A_1 = (\Delta_{1,2} - C_2) K_1 U_1^{-1}$. (35)

Подстановка в (35) значений параметров $\Delta_{1,2}$ из табл. 1 и C_2 из табл. 7 приводит к значению

$$A_1 = 1,0694 \pm 0,017. \tag{36}$$

Значение A_1 может быть также найдено и другим способом — на основе значений потенциалов ионизации только электрона 2.

Из выражения (32) и из экспериментальных данных о потенциалах ионизации следует, что разности смежных потенциалов ионизации электрона определенного номера образуют прямые линейные зависимости от Z . Теоретическая зависимость разности смежных потенциалов имеет вид

$$U_{z+1,N} - U_{z,N} = U_{0N} + D(Z - N) = DZ + U_{0N} - DN, \quad (37)$$

где $Z \geq N$, D — некоторая постоянная величина.

Для электрона 2 эта зависимость реализуется при значениях $U_{02} = 51,039$ В, $D_2 = 27,24 \pm 0,03$ В:

$$U_{z+1,2} - U_{z,2} = 51,039 + 27,24(Z - 2) = 27,24Z - 3,441.$$

(В ряду разностей измеренных потенциалов значение $U_{6,2} - U_{5,2} = 127,30$ В отклоняется от прямой на 4 % своего значения при отклонениях восьми других менее чем на 0,5 %. В связи с этим оно было исключено из расчетов как содержащее очевидную аномально большую погрешность измерения.)

В общем случае произвольного электрона N зависимость разности смежных потенциалов от Z равна

$$U_{z+1,N} - U_{z,N} = 2K^{-1}U_1Z + K^{-1}U_1 - K^{-1}U_1B_N - C_N. \quad (38)$$

Сравнивая выражения (38), (37) и приравнивая члены, не содержащие Z , получим

$$K_N^{-1}U_1 - K_N^{-1}U_1B_N - C_2 = U_{0N} - DN.$$

В случае электрона 2 с учетом $B_2 \equiv A_1$

$$K_2^{-1}U_1(1 - A_1) - C_2 = -3,441,$$

откуда

$$A_1 = K_2(K_2^{-1}U_1 + 3,441 - C_2)/U_1. \quad (39)$$

Подставляя в выражение (39) константы электрона 2 из табл. 7 и вычисляя погрешности, обусловленные отклонениями измеренных значений потенциалов от прямой, получим

$$A_1 = 1,082 \pm 0,003, \quad (40)$$

что в пределах точности расчетов совпадает с (36).

Значение A_1 соответствует представлению, что электрон 1 воздействует на электрон 2 как частица с зарядом

$$e_{e1} = -1,082 e.$$

Обратимся к электрону 3. Согласно зависимости (32), записанной для электрона 3, член (33)

$$B_3 = A_1 + A_2 = 2,476 \pm 0,001 \quad (41)$$

определяет сумму эффективных зарядов двух самых ближних к ядру электронов, действующих на третий. Из (41) и (40) следует, что

$$A_2 = B_3 - A_1 = 2,476 - 1,082 = 1,394 \pm 0,004. \quad (42)$$

Таким образом эффективный заряд электрона 2 оказывается неравным заряду электрона 1. Результат (42) не подтверждает исходное представление об идентичности состояний электронов в слое, при котором оба электрона должны иметь равные заряды

$$e_2 = e_1 = -\frac{1}{2} 2,476 = -1,238 \pm 0,002e.$$

Представление о заряде электрона, отличающемся по величине от элементарного и меняющемся по величине в зависимости от положения в атоме, очевидно, не должно входить в противоречие с опытными данными и экспериментально проверенными базовыми уравнениями атомной физики-уравнением связи энергии с массой

$$W = m c^2 \tag{43}$$

и соотношением между изменением энергии ΔW электрона в атоме с частотой излучения ν

$$\Delta W = h\nu. \tag{44}$$

Рассмотрим, при каких условиях это возможно.

Из спектроскопических измерений хорошо известна частота аннигиляции электрона в атоме $\nu_a = 511$ кГц. Эта частота с большой точностью отвечает уравнениям (43), (44) и прослеживается в элементах в пределах $Z = 6 \div 75$. Чтобы не войти в противоречие с этим фактом, нужно учесть, что при классическом подходе электрон является линейным гармоническим осциллятором, совершающим колебания относительно положения равновесия под действием возвращающего электрического поля. При этом частота колебаний, в том числе и частота электромагнитного излучения ν , является функцией отношения заряда электрона к его массе, т. е. для объяснения неизменности частоты излучения в условиях отличия заряда электрона от элементарного необходимо сделать второе в данном подходе допущение: *изменение заряда электрона сопровождается в той же пропорции изменением его массы*, так что

$$e_e / m_e = \text{const.} \tag{45}$$

Для сохранения частоты излучения при аннигиляции электрона ν_a , требующего выполнения квантового условия

$$\nu_a = h^{-1} m_e c^2 = \text{const} \tag{46}$$

при меняющихся заряде и массе электрона с сохранением условия (45), оказывается необходимым принять и третье условие: *коэффициент, связывающий частоту излучения с изменением энергии электрона, пропорционален величине заряда (или массы) электрона*.

При связи заряда e_e с элементарным e зависимостью

$$e_e = e A(N),$$

масса электрона m_e должна быть связана с его классической массой m_{e0} зависимостью

$$m_e = m_{e0} A(N),$$

и выражение (46) должно быть записано в виде

$$\nu_a = m_{e0} c^2 h^{-1} = A m_{e0} c^2 (Ah)^{-1}. \tag{47}$$

Обобщение (47) на любые случаи излучения электроном электромагнитных волн при изменении энергетического состояния на величину νW приводит к соотношению

$$\nu W = A h \nu. \tag{48}$$

Оно может быть записано в привычном для квантовой механики виде, если полагать

$$Ah = h_A.$$

В этом случае h_A становится функцией отношения A заряда электрона к элементарному.

Зависимость (48) допускает проверку с помощью экспериментальных данных о потенциалах отрыва электронов и длин волн рентгеновского характеристического спектра. Наиболее значимые результаты дает применение этой зависимости к электрону 2, так как значение A_2 оказывается наибольшим. Выражение (48), записанное для длины волны, отвечающей потенциалу отрыва второго электрона в Z -м элементе, имеет вид

$$\lambda_{z,2} = A_2 h c (e U_{z,2})^{-1}, \quad (49)$$

где c — скорость света.

Ввиду наибольших потенциалов отрыва электронов ближней к ядру оболочки естественно ожидать, что связанные с ними длины волн излучений минимальны, т. е. относятся к К-серии характеристического рентгеновского излучения. Ввиду того, что $A_2 > A_1$ и меньшего значения энергии отрыва второго электрона, чем первого, длина волны его излучений в этой серии должна быть максимальной, т. е. связь излучения электрона 2 наиболее вероятна с самой длинноволновой линией α_2 .

Для проверки вывода могут быть использованы значения ионизационных потенциалов второго электрона в элементах с $Z = 10, 11, 12$, у которых одновременно известны и длины волн К-серии.

Вычисленные с помощью (49) значения длин волн электрона 2 и измеренные ([2] со ссылками на [5, 6]) представлены в табл. 8.

Таблица 8

	Номер элемента Z		
	10	11	12
$U_{z,2}$, В	1195,4	1464,7	1761,4
$\lambda_{и}$ (измеренная), 10^{-13} м	14618	11884	9872
λ_p (рассчитанная), 10^{-13} м	14488	11824	9832
$(\lambda_{и} - \lambda_p)/\lambda_p$, %	0,89	0,5	0,4

Как видно, различие рассчитанных и измеренных значений не превышает 1 %, что позволяет предположить, что данная линия возникает либо при полном отрыве электрона 2 от атома, либо при его переходе на внешнюю оболочку с потенциалом отрыва до нескольких десятков вольт. В связи с этим в табл. 9 представлены измеренные значения длин волн $\lambda_{и}$ линии α_2 и рассчитанные λ_p на основе соотношений (49) и (32) для каждого десятого элемента периодической таблицы при $U_1 = 13,600$ В; $A_1 = 1,099$; $A_2 = 1,394$; $K_2 = 0,997$; $C_2 = 2,316$.

Таблица 9

	Номер элемента Z									
	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
$\lambda_{и}, 10^{-13}$ м	14618	3354,81	1436,04	788,513	494,02	335,768	241,00	179,56	137,542	107,661
$\lambda_p, 10^{-13}$ м	14485	3386,0	1472,4	820,34	521,00	360,26	263,87	201,56	158,97	128,58
$\lambda_{и} - \lambda_p$	133	-31,19	-36,36	-31,82	-25,24	-24,49	-22,87	-22,00	-21,43	-20,92
$\Delta\lambda/\lambda$, %	0,91	0,93	2,53	4,0	5,6	7,3	9,5	12,02	15,6	19,4
$A_{z,2}$	1,407	1,381	1,36	1,342	1,322	1,30	1,274	1,242	1,206	1,167

Отклонения рассчитанных длин волн от измеренных оказываются меньше, чем при использовании закона Мозли, однако полного совпадения расчетных и измеренных величин не происходит. С увеличением Z отклонение расчетной длины волны от фактической увеличивается, и это невозможно отнести к

погрешностям измерений. Из этого следует, что мы имеем дело с неучтенным эффектом. Одним из них может быть изменение значения A_2 с увеличением номера элемента. Непостоянство A_2 при изменении Z весьма вероятно в связи с удовлетворительными результатами расчетов ионизационных потенциалов, в основе которых заложено принципиальное неравенство зарядов электронов внутренней оболочки между собой и с элементарным зарядом. В табл. 9 приведены значения параметра $A_2 \equiv A_{22} = f(Z)$, с помощью которых могут быть устранены расхождения между расчетными и измеренными длинами волн.

Выводы

1. Построения показывают, что для достижения практически значимого результата в виде аналитического соотношения для расчета ионизационных потенциалов элементов периодической таблицы (32) необходимо использовать элементы классического и квантового подходов, а также дополнительные условия: (4), $A \neq 1$.

2. Развитый комбинированный подход позволяет построить аналитическое выражение для расчета потенциалов ионизации элементов периодической таблицы с точностью не хуже 2 %. Аналитическое выражение содержит основной параметр $U_1 = 13,600$ В, допускающий квантовое (2) и классическое (3) истолкование.

3. Условием приведения расчетных значений потенциалов ионизации в соответствие с измеренными является отказ от представления об электронах ближней к ядру оболочки (и возможно других) как о частицах с неизменными зарядом и массой, а также от тождественного равенства величин их зарядов заряду протона и элементарному независимо от внешних условий.

4. Представление об изменемости заряда и массы электрона формально удается привести к состоянию непротиворечия с базовыми физическими соотношениями и с некоторыми основными фактическими данными в области атомной спектроскопии, однако многие вопросы, в том числе принципиального характера, остаются пока открытыми. Среди последних можно выделить проблему совмещения результатов построения с экспериментальными данными об электрической нейтральности неионизованных атомов.

5. Обнаруживающаяся количественная связь потенциалов отрыва второго электрона с длинами волн линии α_2 К-серии характеристического излучения нуждается в подтверждении ее неслучайности. Это может быть выполнено путем применения зависимости (48) к электронам других номеров.

Литература

1. Таблицы физических величин: Справочник/Под ред. И. К. Кикоина. — М.: Атомиздат, 1976. С. 419.
2. Там же. С. 797.
3. Справочник химика/Под ред. Б. П. Никольского. Т. 1. Изд. 3. — Л.: Химия, 1971.
4. Аллен К. У. Астрофизические величины: Пер. с англ. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
5. Рентгеновские лучи: Пер. с англ./Под ред. М. А. Блохина. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
6. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. — М.: Гостехтеориздат, 1953.

Analytical expression for calculation of ionization potentials of the periodic system elements

L. A. Pokhmelnykh
ELAT Co., Mexico City, Mexico

A combination of quantum, classical and additional conditions permits to come to the analytical expression for calculation of ionization potentials of all elements of the periodic system with the accuracy less than 2 %. The main admissions made during the construction of the interactions model were: inverse dependence of electron — nucleus distance on element's number and proton — electron charge inequality in the nearest to the nucleus shell. The model and calculations lead to the conclusion about a tie-up of the line α_2 of characteristic X-rays spectrum K-series with ionization potentials of the second electron.